

Validation numérique d'un estimateur de type Eshelby pour l'évaluation des propriétés thermiques et thermoélastiques d'inclusions ellipsoïdales à n phases

H. BOUSOURA^a, S. BARBOURA^b, B. E. HACHI^c, A. GHAZAVIZADEH^d,
M. HABOUSSI^{e,*}

- a. Université Paris 13, CNRS, UPR3407, LSPM, Sorbonne Paris Cité, avenue Jean-Baptiste Clément, 93430, Villetaneuse, France, housseb.bousoura@univ-paris13.fr
- b. Université Paris 13, CNRS, UPR3407, LSPM, Sorbonne Paris Cité, avenue Jean-Baptiste Clément, 93430, Villetaneuse, France, salma.barboura@univ-paris13.fr
- c. Laboratoire de Développement en Mécanique et Matériaux (LDMM), Université de Djelfa, PB 3117, Djelfa, Algérie, br_khalil@yahoo.fr
- d. Université Paris 13, CNRS, UPR3407, LSPM, Sorbonne Paris Cité, avenue Jean-Baptiste Clément, 93430, Villetaneuse, France, akbar.ghazavizadeh@univ-paris13.fr
- e. Université Paris 13, CNRS, UPR3407, LSPM, Sorbonne Paris Cité, avenue Jean-Baptiste Clément, 93430, Villetaneuse, France, haboussi@univ-paris13.fr

Résumé:

Ce travail porte sur la validation numérique d'un nouvel estimateur à champs moyens de type Eshelby, appelé GEEE (General Explicit Eshelby type Estimator). Cet estimateur a d'abord été développé pour évaluer les propriétés élastiques effectives d'inclusions ellipsoïdales multicouches et multiphases, présentant un nombre de couches et des symétries matérielles quelconques. Il est étendu ici à l'évaluation des propriétés thermiques et thermoélastiques. Deux types de comparaison sont proposés : une comparaison directe avec des estimateurs d'inspiration micromécanique à champs moyens de la littérature et une comparaison basée sur des calculs d'homogénéisation par éléments finis à champs complets.

Abstract:

In the present work, we address the numerical validation of a new mean-field estimator, called GEEE for General Explicit Eshelby-type Estimator. This estimator has initially been developed for evaluating equivalent elastic properties of multicoating ellipsoidal inclusions with any number of layer and material symmetries. It is extended here to predict thermal and thermoelastic properties. Two types of comparison are proposed: a direct comparison with mean-field estimators of the literature and a comparison based on a full field homogenization results by finite element calculations.

Mot clefs : Estimateurs à champs moyens – Eshelby - Inclusion ellipsoïdale à n phases – Conductivité thermique – Dilatation thermique – Homogénéisation périodique par éléments finis

1. Introduction

Un estimateur à champs moyens dit GEEE (*General Explicit Eshelby type Estimator*) précédemment développé pour évaluer les propriétés élastiques effectives d'inclusions ellipsoïdales multicouches et multiphases, présentant un nombre de couches et des symétries matérielles quelconques, est étendu ici aux cas de la thermique en suivant la même démarche détaillée dans la référence [1] pour l'élasticité. Dans l'établissement du GEEE élastique, un usage est fait du schéma d'homogénéisation dilué basé sur la solution d'Eshelby [2], exacte dans le cas d'un composite formé par une inclusion ellipsoïdale unique dans un milieu infini. L'extension de l'estimateur GEEE aux cas des propriétés thermiques et thermoélastiques d'inclusions ellipsoïdales multicouches est basée sur l'exploitation de l'équivalent du schéma dilué pour la thermique [3-4]. Le domaine d'application de tels estimateurs à champs moyens est très large puisque la configuration ellipsoïdale permet d'approximer de manière satisfaisante différentes formes de renforts, comme les fibres, plaquettes ou les charges particulières, parmi les plus répondues. L'estimateur GEEE thermique et thermoélastique ainsi développé est implémenté dans Matlab. Des comparaisons sont proposées ici pour asseoir sa validité numérique. Deux types de comparaisons sont proposés. Un premier type où GEEE est comparé avec d'autres estimateurs à champs moyens de la littérature, de types Eshelby et non Eshelby comme le modèle double inclusion de Hori & Nemat Nasser [5-6] et le modèle (n+1) phases de Hervé [7], respectivement. Dans la deuxième comparaison, GEEE est comparé, selon un scénario qui sera décrit ultérieurement, à des résultats d'homogénéisation périodiques basée sur des champs complets, calculés par éléments finis dans ABAQUS. Dans toutes ces simulations numériques, les effets du contraste entre les phases adjacentes et des fractions volumiques des phases en présence sont examinés.

2. Modélisations thermique et thermoélastique d'hétérogénéités multiphasées avec GEEE

2.1. Conductivité thermique (GEEE thermique)

L'approche GEEE appliquée à la détermination du tenseur de conductivité thermique d'une hétérogénéité ellipsoïdale à n phases est présentée ici. Comme dans le cas de l'élasticité, la solution d'Eshelby,[3-4], exacte dans le cas d'une inclusion unique dans un milieu infini, est exploitée pour formuler l'estimateur. Pour obtenir l'expression du tenseur d'ordre 2 de la conductivité thermique effective d'une inclusion à 2 phases selon l'approche GEEE, nous comparons les conductivités thermiques effectives d'un même milieu vu selon deux façons différentes, matérialisées par les configurations (I) et (II) dans la figure 1, forcément équivalentes en termes de propriétés.

Dans la configuration (I), le milieu est constitué d'une inclusion ellipsoïdale noyée dans une matrice supposée infinie soumise à un gradient de température uniforme sur les bords extérieurs du domaine (figure 1.a). Le schéma d'homogénéisation dilué, exact dans ce cas, nous donne l'expression analytique suivante du tenseur de conductivité thermique effective [4]:

$$\mathbf{K}_I^{eff} = \mathbf{K}^2 + f_1 \left[(\mathbf{K}^1 - \mathbf{K}^2) \mathbf{A}_{dil}^1 \right] \text{ où } \mathbf{A}_{dil}^1 = (\mathbf{I} + \mathbf{S}^1 (\mathbf{K}^2)^{-1} (\mathbf{K}^1 - \mathbf{K}^2))^{-1} \quad (1)$$

avec \mathbf{K}^2 , la conductivité thermique de la matrice, \mathbf{K}^1 , la conductivité thermique de l'inclusion, f_1 , la fraction volumique de l'inclusion et \mathbf{S}^1 , le tenseur d'Eshelby d'ordre 2 dont l'expression peut être trouvée dans la référence [3] pour différentes formes géométriques ellipsoïdales.

Dans la configuration (II), l'inclusion est entourée d'un enrobage de même matériau que la matrice (figure 1.b). Après avoir remplacé l'inclusion ellipsoïdale enrobée par une inhomogénéité équivalente, le tenseur de conductivité thermique est recalculé en utilisant le même schéma d'homogénéisation dilué comme :

$$\mathbf{K}_{II}^{eff} = \mathbf{K}^2 + f_{eq} \left[\left(\mathbf{K}^{eq} - \mathbf{K}^2 \right) \mathbf{A}_{dil}^{eq} \right] \quad \text{où} \quad \mathbf{A}_{dil}^{eq} = \left(\mathbf{I} + \mathbf{S}^{eq} (\mathbf{K}^2)^{-1} (\mathbf{K}^{eq} - \mathbf{K}^2) \right)^{-1} \quad (2)$$

Le tenseur de conductivité thermique ainsi obtenu est fonction de la conductivité thermique de l'inhomogénéité équivalente, \mathbf{K}^{eq} , de sa fraction volumique, f_{eq} , et du tenseur d'Eshelby, \mathbf{S}^{eq} . Comme les conductivités thermiques effectives sont les mêmes pour les deux configurations (I) et (II), on en déduit l'expression suivante de la conductivité thermique de l'inclusion enrobée :

$$\mathbf{K}_I^{eff} = \mathbf{K}_{II}^{eff} \quad \Rightarrow \quad \mathbf{K}^{eq} = \mathbf{K}^2 + \frac{f_1}{f_{eq}} \mathbf{K}^2 \left[\left(\mathbf{K}^1 - \mathbf{K}^2 \right)^{-1} \mathbf{K}^2 + \left(\mathbf{S}^1 - \frac{f_1}{f_{eq}} \mathbf{S}^{eq} \right) \right]^{-1} \quad (3)$$

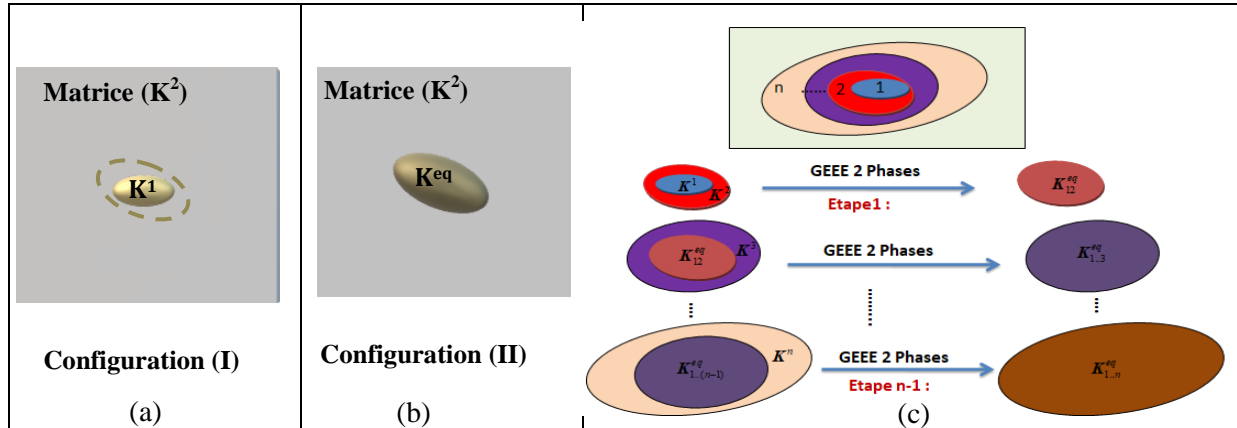


Figure 1. (a) Schéma d'une inclusion ellipsoïdale dans une matrice infinie (b) L'inclusion ellipsoïdale enrobée est remplacée par une inclusion équivalente (c) Schéma de généralisation de GEEE pour n phases

Cette dernière expression du tenseur de conductivité thermique présente l'avantage d'être une fonction explicite de grandeurs connues. Ceci va simplifier sa mise en œuvre numérique et son exploitation dans différents problèmes. L'expression (3) peut être généralisée pour une inclusion à n phases selon le schéma décrit dans la figure 1.c.

2.2. Dilatation thermique (GEEE thermoélastique)

En adoptant la même démarche que précédemment et en se basant sur les travaux de Levin [8], on retrouve l'expression suivante du tenseur d'ordre 2 des constantes thermoélastiques d'une hétérogénéité ellipsoïdale à 2 phases :

$$\boldsymbol{\lambda}^{eq} = \boldsymbol{\lambda}^2 + \frac{f_1}{f_{eq}} \left(\mathbf{A}_{dil}^{eq} \right)^{-1} \left(\mathbf{A}_{dil}^1 \right) \left(\boldsymbol{\lambda}^1 - \boldsymbol{\lambda}^2 \right) \quad (4)$$

où \mathbf{A}_{dil}^1 et \mathbf{A}_{dil}^{eq} sont les tenseurs de localisation de déformation obtenus à partir du schéma dilué d'Eshelby pour l'élasticité [2] :

$$\mathbf{A}_{dil}^1 = \left(\mathbf{I} + \mathbf{S}^1 (\mathbf{C}^2)^{-1} (\mathbf{C}^1 - \mathbf{C}^2) \right)^{-1} ; \quad \mathbf{A}_{dil}^{eq} = \left(\mathbf{I} + \mathbf{S}^{eq} (\mathbf{C}^2)^{-1} (\mathbf{C}^{eq} - \mathbf{C}^2) \right)^{-1} \quad (5)$$

Le tenseur de dilatation thermique effectif de l'inclusion hétérogène se déduit alors par la relation suivante :

$$\boldsymbol{\alpha}^{eq} = \left(\mathbf{C}^{eq} \right)^{-1} \boldsymbol{\lambda}^{eq} \quad (6)$$

où \mathbf{C}^{eq} est le tenseur de rigidité effectif obtenu également par GEEE dans le cas élastique [1].

Pour la généralisation du problème thermoélastique d'une inclusion ellipsoïdale à n phases, on procède de la même manière, par une démarche récursive décrite dans la figure 1.c.

3. Résultats et discussions

3.1. Comparaisons avec les estimateurs à champs moyens

On considère une hétérogénéité sphérique à trois phases isotropes avec des interfaces parfaites entre les différentes phases. On note c , le contraste entre les propriétés physiques (thermiques et mécaniques) des phases adjacentes, soit $c = k_{int2}/k_{int1} = k_{int1}/k_{inc}$. Lorsque $c > 1$, l'inclusion (k_{inc}) est thermiquement moins conductrice que le premier enrobage (k_{int1}) lui-même moins conducteur que le deuxième enrobage (k_{int2}) et inversement pour $c < 1$. Dans les simulations à venir $c \in [10^{-2}, 10^2]$ et $k_{inc} = 1Wm^{-1}K^{-1}$.

Les estimations de la conductivité thermique équivalente données par les différentes approches examinées sont reportées sur la figure 2 en fonction du contraste pour deux configurations où les fractions de l'inclusion et de l'interphase 2 sont inversées.

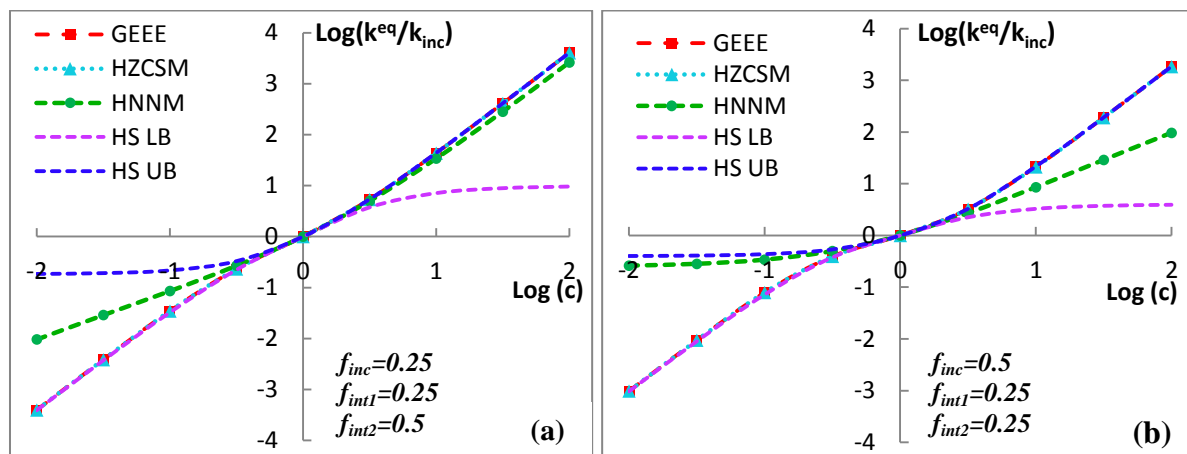


Figure 2. Evolution de la conductivité thermique équivalente k^{eq} en fonction du contraste c

On observe d'après la figure 2 que pour des contrastes faibles les différents estimateurs donnent des résultats très proches. Pour des contrastes élevés, l'estimateur GEEE est en accord avec le modèle à $(n+1)$ phases (HZCSM) pour les deux fractions volumiques du cœur ou de l'enrobage examinées. Par ailleurs, le modèle de double inclusion de Horii & Nemat-Nasser (HNNM) s'écarte des estimations données par GEEE et HZCSM lorsque le contraste c est relativement élevé ($\text{Log}(c) > 0,5$) ou faible ($\text{Log}(c) < -0,5$). Le scénario de l'écartement de HNNM par rapport à GEEE et HZCSM change selon que la fraction volumique du deuxième enrobage est plus importante que celle du cœur ou le contraire (figure 2.a et 2.b). On constate également que les résultats des différents estimateurs respectent bien les bornes inférieures et supérieures de Hashin-Shtrikman [9].

Sur la figure 3, sont présentés les coefficients de dilatation thermique équivalents pour une hétérogénéité sphérique à trois phases en fonction du contraste c entre les phases adjacentes. Les propriétés élastiques et thermoélastiques des différentes phases retenues pour cette simulation sont ($E_{int2}/E_{int1} = E_{int1}/E_{inc} = c$; $E_{inc} = 1\text{GPa}$, $\nu_{inc} = \nu_{int1} = \nu_{int2} = 0,3$; $\alpha_{int2}/\alpha_{int1} = \alpha_{int1}/\alpha_{inc} = 1/c$; $\alpha_{int2} = 10^{-5}/^{\circ}\text{C}$). Il est à noter qu'on associe au matériau présentant une rigidité élevée, un coefficient de dilatation faible.

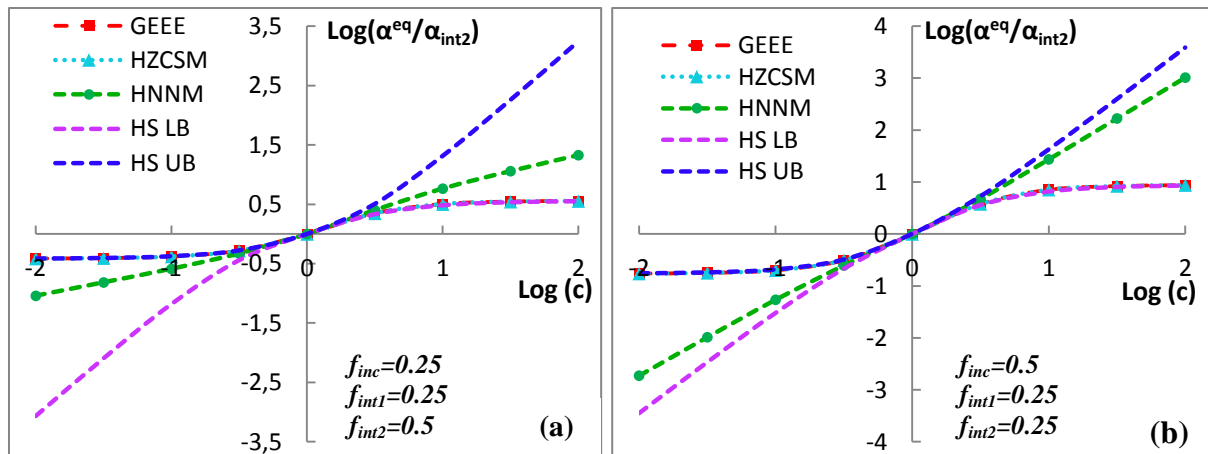


Figure 3. Evolution du coefficient de dilatation thermique équivalent α^{eq} en fonction du contraste c

Comme dans le cas thermique, on constate que les différents modèles se rejoignent pour les faibles valeurs de contraste ($c \approx 1$). Les modèles HZCSM et GEEE donnent des estimations concordantes du coefficient de dilatation thermique quelque soit le contraste entre les différentes phases et les fractions volumiques des phases. Par contre, le modèle HNNM s'écarte de ces deux derniers modèles en surestimant le coefficient de dilatation thermique pour ($\text{Log}(c) > 0,5$) ou en la sous-estimant pour ($\text{Log}(c) < -0,5$), selon les fractions volumiques des phases retenues. Toutes les estimations thermoélastiques obtenues respectent bien les bornes de Hashin-Shtrikman [10-11].

3.2. Validation numérique par comparaison avec l'homogénéisation à champs complets

Les estimations des propriétés effectives thermiques et thermoélastiques obtenues avec GEEE sont comparées ici aux résultats de l'homogénéisation numérique par éléments finis, selon le scénario suivant : D'abord, les propriétés effectives d'un milieu à trois phases (cœur/enrobage/matrice) sont obtenues à partir d'un calcul par éléments finis complet, réalisé en considérant un volume élémentaire représentatif cubique périodique, dans ABAQUS. Ensuite, l'ensemble cœur/enrobage est remplacé par une inclusion équivalente dont les propriétés ont été déterminées par les différents estimateurs analytiques examinés. Les propriétés effectives du nouveau système (inclusion équivalente/matrice) sont recalculées numériquement sur la base des champs complets obtenus par éléments finis. En admettant que les deux calculs devraient donner des grandeurs effectives très proches si l'inclusion équivalente était définie correctement avec l'estimateur analytique, une comparaison entre les deux calculs nous permettra d'asseoir la validité et l'efficacité numérique de l'estimateur analytique utilisé pour définir l'inhomogénéité équivalente.

Pour les différentes simulations réalisées, on suppose que la fraction volumique de l'inclusion est égale à celle de l'interphase ($f_{inc}=f_{int}$ et $f_{IE}=f_{inc}+f_{int}$).

La figure 4 représente l'évolution de la conductivité thermique effective du composite en fonction de la fraction volumique de l'inclusion équivalente, obtenue par éléments finis selon les deux scénarios décrits précédemment, i.e. modélisation complète des trois phases (cœur/enrobage/matrice) et modélisation des deux phases (inclusion équivalente / matrice).

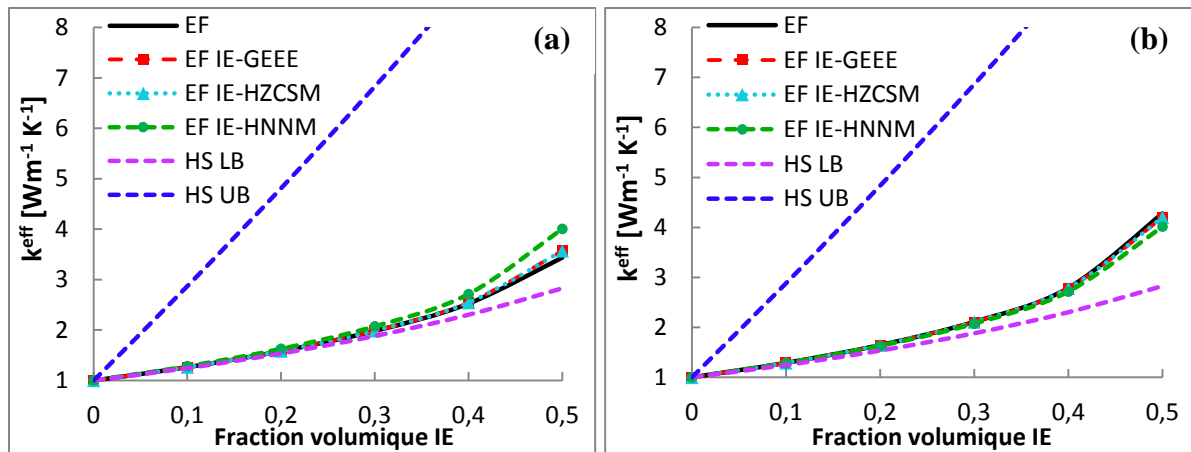


Figure 4. Evolution de la conductivité thermique effective en fonction de la fraction volumique de l'inclusion équivalente

$$(a) k_{inc} = 50 \text{ Wm}^{-1} \text{ K}^{-1}, k_{int} = 5 \text{ Wm}^{-1} \text{ K}^{-1}, k_{mat} = 1 \text{ Wm}^{-1} \text{ K}^{-1}$$

$$(b) k_{inc} = 5 \text{ Wm}^{-1} \text{ K}^{-1}, k_{int} = 50 \text{ Wm}^{-1} \text{ K}^{-1}, k_{mat} = 1 \text{ Wm}^{-1} \text{ K}^{-1}$$

Il ressort des courbes de la figure 4.a que GEEE combiné aux EF (EF IE-GEEE) et HZCSM (EF IE-HZCSM) donnent des résultats très proches à ceux obtenus par le calcul élément finis complet (EF). Concernant l'estimateur HNNM (EF IE-HNNM), les résultats obtenus avec cet estimateur sont proches à ceux obtenus par EF tant que la fraction volumique de l'inclusion équivalente ne dépasse pas 30 %. Au-delà de cette valeur, les estimations de HNNM s'écartent des résultats du calcul éléments finis complet, avec un écart de 16% pour la fraction volumique maximale de l'inclusion équivalente. Les mêmes remarques peuvent être faites concernant les estimations de la conductivité thermique effective reportées sur la figure 4.b, réalisées dans le cas où le cœur est moins conducteur que l'interphase. Il est à noter que tous les résultats numériques obtenus vérifient bien les bornes de Hashin-Shtrikman.

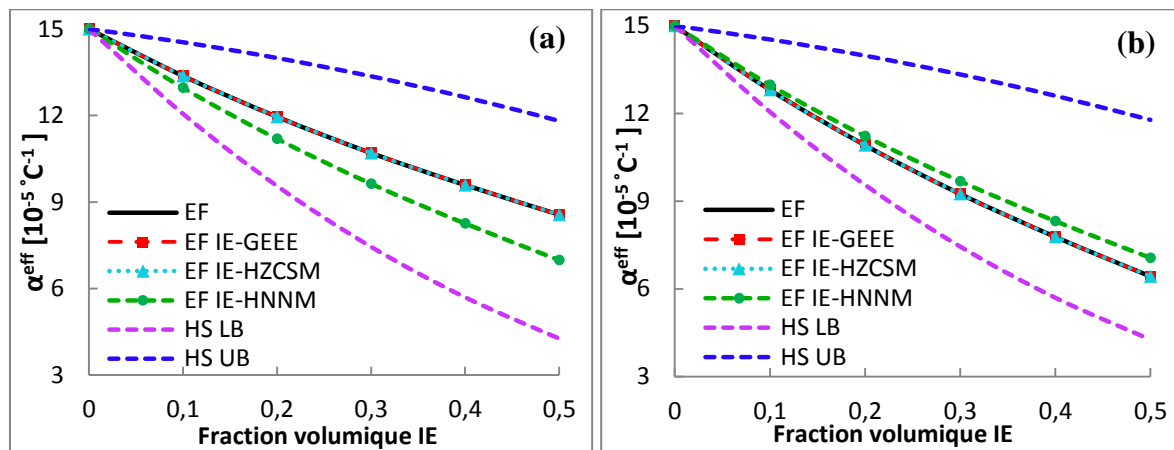


Figure 5. Evolution du coefficient de dilatation thermique effectif en fonction de la fraction volumique de l'inclusion équivalente

$$(a) E_{inc} = 100 \text{ GPa}, \alpha_{inc} = 10^{-6} \text{ C}^{-1}, E_{int} = 10 \text{ GPa}, \alpha_{int} = 10^{-4} \text{ C}^{-1}, E_{mat} = 0.1 \text{ GPa}, \alpha_{mat} = 15.10^{-5} \text{ C}^{-1}$$

$$(b) E_{inc} = 1 \text{ GPa}, \alpha_{inc} = 10^{-4} \text{ C}^{-1}, E_{int} = 100 \text{ GPa}, \alpha_{int} = 10^{-6} \text{ C}^{-1}, E_{mat} = 0.1 \text{ GPa}, \alpha_{mat} = 15.10^{-5} \text{ C}^{-1}$$

De façon analogue au cas thermique, on reporte sur les deux figures 5.a et 5.b les évolutions du coefficient de dilatation thermique effectif en fonction de la fraction volumique de l'inclusion

équivalente. Les mêmes remarques que précédemment peuvent être faites. Les résultats obtenus avec les estimateurs GEEE (EF IE-GEEE) et (n+1) phases (EF IE-GEEE, HZCSM) sont très proches aux résultats obtenus par éléments finis. Concernant l'estimateur HNNM, les résultats obtenus avec cet estimateur s'écartent des résultats de référence (EF), l'écart devenant plus important pour les fractions volumiques élevées en particulier dans le cas où l'inclusion est plus rigide que l'interphase (figure 5.a).

Conclusion

Un nouvel estimateur, appelé GEEE (thermique et thermoélastique), des propriétés thermiques et thermoélastiques d'inclusions multicouches et multiphases est proposé dans ce travail. Il se présente comme une extension d'un estimateur déjà existant, récemment développé pour l'élasticité. La capacité prédictive de GEEE en thermique et thermoélasticité est démontrée par des comparaisons numériques faites avec d'autres approches à champs moyens ainsi qu'avec des calculs d'homogénéisation numérique par éléments finis à champs complets.

Références

- [1] A. Ghazavizadeh, M. Haboussi, A. Abdul-Latif, et A. Jafari, A general and explicit Eshelby-type estimator for evaluating the equivalent stiffness of multiply coated ellipsoidal heterogeneities, *International Journal of Solids and Structures*, 2019.
- [2] J. D. Eshelby, The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion, and related problems, *Proc. R. Soc. Lond. A*, vol. 241, n° 1226, p. 376-396, 1957.
- [3] H. Hiroshi et T. Minoru, Equivalent inclusion method for steady state heat conduction in composites, *International Journal of Engineering Science*, vol. 24, n° 7, p. 1159-1172, 1986.
- [4] J.-K. Lee, Prediction of thermal conductivity of composites with spherical fillers by successive embedding, *Arch Appl Mech*, vol. 77, n° 7, p. 453-460, 2007.
- [5] M. Hori et S. Nemat-Nasser, Double-inclusion model and overall moduli of multi-phase composites, *Mechanics of Materials*, vol. 14, n° 3, p. 189-206, 1993.
- [6] J. Y. Li, Thermoelastic behavior of composites with functionally graded interphase: a multi-inclusion model, *International Journal of Solids and Structures*, vol. 37, n° 39, p. 5579-5597, 2000.
- [7] E. Herve, Thermal and thermoelastic behaviour of multiply coated inclusion-reinforced composites, *International Journal of Solids and Structures*, vol. 39, n° 4, p. 1041-1058, 2002.
- [8] Levin, V.M., On the coefficients of thermal expansion of heterogeneous materials, *Mekh. Tverdogo Tela*, 88-94, 1967.
- [9] Z. Hashin et S. Shtrikman, Conductivity of Polycrystals, *Physical Review*, vol. 130, n° 1, p. 129-133, 1963.
- [10] B. W. Rosen et Z. Hashin, Effective thermal expansion coefficients and specific heats of composite materials, *International Journal of Engineering Science*, vol. 8, n° 2, p. 157-173, 1970.
- [11] R. A. Schapery, Thermal Expansion Coefficients of Composite Materials Based on Energy Principles, *Journal of Composite Materials*, vol. 2, n° 3, p. 380-404, 1968.